Title	多重逆反復法の応用 : 部分空間法(科学技術における数値計算の理論と応用)
Author(s)	鈴木, 俊夫
Citation	数理解析研究所講究録 (1996), 944: 165-173
Issue Date	1996-04
URL	http://hdl.handle.net/2433/60188
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

数理解析研究所講究録
944巻 1996年 165-173

多重逆反復法の応用－部分空間法－

山梨大学教育学部　鈴木俊夫 (SUZUKI Toshio)

Abstract

円周等分上のパラメータを用いた逆反復法（多重逆反復法）を近接した固有値の集合の数値計算へ応用する。大行列の固有値の一部をその固有空間の次元と同サイズの行列の問題に帰着させて計算の効率化を図る部分空間法を扱う。固有空間の近似精度を用いて固有値の精度を評価する定理が証明され、それと多重逆反復法を組み合わせた数値計算のアルゴリズムが提案される。また数値実験の結果も示される。

n 次実対称行列を A、その固有値と固有ベクトルの対を $(\lambda_k,\phi_k), k=1,2,\cdots,n$ とする。A の p 次元不変部分空間 H_p の正規直交ベクトルを $\{x_1,\cdots,x_p\}$ とし、$n\times p$ 行列 $X=(x_1,\cdots,x_p)$ を用いて定められる行列を $\widetilde{A}={}^tXAX$ とする。この時 H_p が A の p 個の固有値 $\{\lambda_1,\cdots,\lambda_p\}$ の固有空間であるならば $\widetilde{A}$ の固有値は $\{\lambda_1,\cdots,\lambda_p\}$ と一致する。さらに A の不変部分空間に近い部分空間 $\widetilde{H_p}$ が得られれば、それからつくられる p 次の行列の固有値を計算することによって A の近似固有値を求めることが出来る (cf. Parlett [2])。この方法を部分空間法とよぶ。このアイデアに沿った実用化の報告は後・村田 [1] にみることができる。

これに関連した固有値の精度については次のような定理が知られている。(Parlett [2])

定理 (Kahan) ． m 個の正規直交ベクトルから得られた $n\times m$ 行列 Q に対して、$\widetilde{A}=Q^*AQ, R=AQ-Q\widetilde{A}$ とする。このとき m 個の A の固有値 $\{\alpha_j, j=1,\cdots,m\}$ で $\widetilde{A}$ の固有値 θ_j と 1 対 1 に対応し、$|\theta_j-\alpha_j|\le\|R\|, j=1,\cdots,m$ を満たすものが存在する。

これに対して我々は $\widetilde{H_p}$ の基底が $O(\varepsilon)$ の近似固有ベクトルならば $\widetilde{A}$ の固有値 θ_j で $|\theta_j-\alpha_j|=O(\varepsilon^2)$ となるものが存在することを示した (§2. 定理 1)。Kahan の定理の結果を我々の場合に当てはめてみると $|\theta_j-\alpha_j|=O(\varepsilon)$ に相当する。従って求めたい固有値の精度に対する $\widetilde{H_p}$ の計算精度についての許容条件が緩和できることがわかったことになる。

$\widetilde{H_p}$ の近似をどういう方法で計算するかの提案が本論文の主題である。提案する方法は固有空間への射影作用素の数値積分をするのと同値であるので、必要な固有空間ベクトルが同程度の精度で得られるという特徴があり、後・村田 [1] の場合の同時逆反復法とは似て非なるものである。基本的な考え方は Suzuki [3] によるため、§1 でその関連する部分を復習し、§2 で数値計算のアルゴリズムを念頭に置いた理論の説明をする。§3 で数値計算例を示し、理論通り

に計算できることを確認する。尚、この方法は理論的のは非対称行列にも適用できるものであるが、今回は数値実験がまだ出来ていないので対象行列の場合についてのみ取り扱う。

1 多重逆反復法の理論からの準備

n 次行列 A の固有値を $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$、対応する固有ベクトルを $\phi_1, \cdots, \phi_n$ とする。複素平面上に中心 λ, 半径 r の円 C をとり、さらに円 C 上に m 等分点 $\mu_j, j = 1, \cdots, m$ をとる。これを円 C 上の m 個の円周等分点と呼ぶことにする。(i.e. $\mu_j = \lambda + \tau\omega^{j-1}, \quad j = 1, \cdots, m$ ただし $|\tau| = r$, $\omega = \exp(\frac{2\pi\imath}{m})$)

この円周等分点を用いた、次の式で定める逆反復法の一般化を多重逆反復法とよぶ。

$$z^{(i+1)} = \frac{\tau^{-(m-1)}}{m} \sum_{j=1}^{m} \omega^{j-1}(A - \mu_j)^{-1} z^{(i)}, \qquad i = 0, 1, \cdots \tag{1.1}$$

注1. $z^{(0)} = \sum_{k=1}^{n} a_k \phi_k$ とすると、(1.1) の右辺は τ を一般に複素数として、次の様に表すことができる。(cf. Suzuki([3]))

$$z^{(1)} = \frac{\tau^{-(m-1)}}{m} \sum_{k=1}^{n} \frac{m\tau^{m-1}}{(\lambda_k - \lambda)^m - \tau^m} a_k \phi_k.$$

注2. 関数解析の一般論で知られているように円 C 内の固有値に対応する固有空間への射影作用素 $P_C : z \to P_C z$ は次のような積分で表される。

$$P_C z = \frac{-1}{2\pi\imath} \oint_C (A - \zeta)^{-1} z \, d\zeta$$

(1.1) の右辺、はこの積分を数値積分の形で表したものと（定数をのぞいて）見なすことが出来る。i.e.

$$z^{(1)} \sim \text{const.} \oint_C (A - \zeta)^{-1} z^{(0)} \, d\zeta$$

2 部分空間法による固有値の計算

2.1 定理

この節以降では、A は実対称行列とし、固有ベクトル $\{\phi_k\}$ は正規化されているものとする。 A の固有値の部分集合を $\{\lambda_1, \cdots, \lambda_p\}$ とし、それに対応した固有ベクトルで張られる

p 次元固有空間を H_p とする。H_p の正規直交基底を１組とり、それを $\{x_1,\cdots,x_p\}$ とする。$n\times p$ 行列 $X=(x_1,\cdots,x_p)$ を用いて、$\tilde{A}={}^tXAX$ を定義すると、$\tilde{A}$ の固有値は $\{\lambda_1,\cdots,\lambda_p\}$ である。このとき次の定理が成り立つ。

定理１ ．実対称行列 A の固有値の一部 $\{\lambda_1,\cdots,\lambda_p\}$ に対応する固有空間を H_p とする。正規直交ベクトル $\{\widetilde{x_1},\cdots,\widetilde{x_p}\}$ が**条件："H_p の正規直交基底 $\{x_1,\cdots,x_p\}$ で $\widetilde{x_j}=x_j+O(\varepsilon)$ となるものが存在する。"** を満たすならば、${}^t\tilde{X}A\tilde{X}$ の固有値 $\{\theta_1,\cdots,\theta_p\}$ について $|\lambda_j-\theta_j|=O(\varepsilon^2)$ が成り立つ。ただし、${}^t\tilde{X}=(\widetilde{x_1},\cdots,\widetilde{x_p})$ である。

定理１の証明

$j=1,\cdots,p$ に対して $Xu_j\equiv(x_1,\cdots,x_p)u_j=\phi_j$ となる u_j をとる。

$\tilde{A}u_j\equiv{}^tXAXu_j={}^tXA\phi_j=\lambda_j{}^tXXu_j=\lambda_ju_j,\ \ B\equiv{}^t\tilde{X}A\tilde{X}=\tilde{A}+E$

とすると、$E=\mathrm{O}(\varepsilon)$ より

$\exists\widetilde{u_j}$ s.t. $B\widetilde{u_j}=\widetilde{\lambda_j}\widetilde{u_j}$ かつ $\widetilde{u_j}=u_j+\mathrm{O}(\varepsilon)$. が成り立つ。

(cf. Wilkinson [4], p67)

したがって、$\widetilde{\lambda_j}=\lambda_j+\nu_j(\varepsilon)$ とおいて $\nu(\varepsilon)=\mathrm{O}(\varepsilon^2)$ を言えばよい。

$\tilde{X}\widetilde{u_j}=(X+\mathrm{O}(\varepsilon))(u_j+\mathrm{O}(\varepsilon))\equiv\phi_j+v_j$ とおくと $\|v_j\|=O(\varepsilon)$ であるので

$$\begin{aligned}{}^t\widetilde{u_j}B\widetilde{u_j}-\lambda_j{}^t\widetilde{u_j}u_j&=({}^t\phi_j+{}^tv_j)A(\phi_j+v_j)-\lambda_j({}^t\phi_j+{}^tv_j)(\phi_j+v_j)\\&={}^tv_jAv_j-\lambda\|v_j\|^2=\mathrm{O}(\varepsilon^2)\qquad\text{となる。}\end{aligned}$$

これと、$B\widetilde{u_j}=\widetilde{\lambda_j}\widetilde{u_j}$ より、 $\nu_j(\varepsilon)\|\widetilde{u_j}\|^2=\mathrm{O}(\varepsilon^2)$ を得る。∎

注３．定理１は、固有値の精度が $O(\varepsilon^2)$ を要求されるならば、固有空間ベクトルを $O(\varepsilon)$ 程度の精度で計算し、p 次行列の固有値を求めればよいことを示している。

2.2 写像 Φ

３つのパラメータをもつ写像 $z\to\Phi(\lambda,r,m;z)$ **の定義**: $\lambda\in\mathbf{R},r>0,m$ (偶数) に対し $\tau=re^{\frac{\pi i}{m}},\omega=e^{\frac{2\pi i}{m}}$ とし、$\mu_j=\lambda+\tau\omega^{j-1},j=1,\cdots,m$ としたとき、

$$y=\Phi(\lambda,r,m;z)=\frac{\tau^{-(m-1)}}{m}\sum_{j=1}^{m}\omega^{j-1}(A-\mu_j)^{-1}z\quad\text{と定義する。}$$

A が実対称行列であるときは固有値、固有ベクトルは共に実数である。また、τ の定め方から各 μ_j は実数にはならないので$\Phi(\lambda,r,m;z)$ は常に定義でき、§1 の**注１** と$\tau^m=-r^m$ であることから次の命題を容易に示すことが出来る。

命題2 ． $z \to \Phi(\lambda, r, m; z)$ は $\mathbf{R}^n$ から $\mathbf{R}^n$ への線形写像をを定め、$z = \sum_{k=1}^{m} a_k \phi_k$ とすると

$$y = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{(\lambda_k - \lambda)^m + r^m} a_k \phi_k.$$

と表される。

注4 ϕ_k の各係数について λ_k が円 C の内部か外部かに応じて次の様に評価できる。

$$|\lambda_k - \lambda| < r \quad ならば \quad \frac{1}{2r^m} \leq \frac{1}{(\lambda_k - \lambda)^m + r^m} \leq \frac{1}{r^m}$$
$$|\lambda_k - \lambda| > r \quad ならば \quad \frac{1}{(\lambda_k - \lambda)^m + r^m} \leq \frac{1}{\left(\frac{\lambda_k - \lambda}{r}\right)^m + 1} \frac{1}{r^m}$$

2.3 アルゴリズム

2.1, 2.2 より、1カ所に集中した固有値を部分空間法で必要な精度まで求める数値計算のアルゴリズムが得られる。区間 (a, b) 内に含まれる p 個の A の固有値の集合を σ とし、それ以外の固有値は (a, b) から距離 d 以上離れているとする。

[σ を精度 $O(10^{-2t})$ で求めるアルゴリズム]

1. $\lambda = \frac{a+b}{2}, r = \frac{b-a}{2}, R = r - d$ と定める。
2. m は $(\frac{r}{R})^m < 10^{-t}$ を満たす偶数を定める。
3. 一次独立な $q(> p)$ 個のベクトル $z_1, \cdots, z_q$ をとり、$w_h = \Phi(\lambda, r, m; z_h), h = 1, \cdots, q$ を計算し、次の様にして p 個の正規直交ベクトルをとりだす。: $v_1 = w_1/\|w_1\|$ とし、$k \geq 2$ の v_k については最初の h は $h = 2$ として次の操作を実行する。($k = 2, \cdots, p$)
   - $\widetilde{w_h} \equiv w_h - \sum_{j=1}^{k-1}(w_h, v_j)v_j$ が $\|\widetilde{w_h}\| \gg O(10^{-t})$ ならば $v_k = \widetilde{w_h}/\|\widetilde{w_h}\|$ かつ $k = k+1$
   - $\|\widetilde{w_h}\| = O(10^{-t})$ ならば $k = k$
   - $h = h + 1$
4. $V = (v_1, \cdots, v_p)$ とし、p 次対称行列 $\widetilde{A} = {}^t VAV$ の固有値を計算する。

T_0 は固有ベクトルの精度を表す値であるが問題に応じて意図的に別の値を定める場合もある。

注5. 初期ベクトルが十分多種類の固有ベクトル成分を含む時は $q = p$ でよい。

3 数値計算例

3.1 テスト行列と方法

数値実験をおこなった行列は次のようにして構成した。: 乱数を用いて n 次の列ベクトルを n 個つくり、それを Schmidt の方法で正規直交化して $\phi_1, \cdots, \phi_n$ を用意する。固有値とするべき値 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ を定め、$A = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \phi_k {}^t\phi_k$ と定義する。

A については数例のテストを行ったが、すべて理論通りの結果が得られているので、ここでは次の 1 例の結果だけを示す。

$n = 25$ とし、固有値の集合 σ は区間 $(1,3)$ の中に 11 個、特に 2.0 の近くに 4 個、2.001 の近くに 2 個、2.0001 の近くに 3 個設定した。i.e. $\sigma = \sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \sigma_3 \cup \sigma_4 \cup \sigma_5$ としたとき、

$\sigma_1 = \{1.999952,\ 1.9999999999995,\ 2.000036,\ 2.00005\}$,

$\sigma_2 = \{2.0010412,\ 2.00106\}$,

$\sigma_3 = \{2.1,\ 2.100026,\ 2.100046\}$,

$\sigma_4 = \{2.2\}$,

$\sigma_5 = \{1.0,\ 2.9,\ 11.0,\ 12.0,\ 13.0,\ 15.0,\ 17.0,\ 18.0,\ 19.0,\ 20.0,\ 21.0,\ 22.0,\ 23.0,\ 24.0,\ 25.0\}$.

初期ベクトルは、各成分が絶対値 0.5 以下の乱数をもつ n 次行列と単位行列との和の各列を初期ベクトルとした。($q = n$ として計算した。)

計算例の数値の示し方とその意味は、次の通りである。

(1) $\|\widetilde{w_h}\|$ の値が求める固有空間ベクトルの大きさを表していると考えてよいので、$\|\widetilde{w_h}\|$ の値を示した。ただし、$\|\widetilde{w_h}\|$ が同様な値を示すときは適宜省略した。

(2) ${}^tVAV$ の固有値を 2 分法で 10^{-14} の精度まで計算した値を示した。

(3) 固有空間ベクトルの誤差のオーダーを表す値 E_r を示した。これは $\|\widetilde{w_{p+i}}\| \sim E_r$ となるべき値であるが E_r を表す式は計算例の中で示す。

(I) σ_1 を求める計算例

$\lambda = 2.0,\ m = 6,\ T_0 = 0.1$ を固定し、r を変化させたときの状況を 3 つの例で示す。

(i) $n = 25, \quad \lambda = 2.0, \quad \underline{r = 0.0001}, \quad m = 6, \quad T_0 = 0.1$

$\|\widetilde{w_2}\| = .356$

$\|\widetilde{w_3}\| = .990$

$\|\widetilde{w_4}\| = .623$

$\|\widetilde{w_5}\| = .422e-06$

$\|\widetilde{w_6}\| = .143e-05$

以下省略.

固有値（ 二分法による）

$\widetilde{\lambda_1} = 2.00005000000000$

$\widetilde{\lambda_2} = 2.00003600000000$

$\widetilde{\lambda_3} = 1.99999999999950$

$\widetilde{\lambda_4} = 1.99995200000000$

一次独立なベクトルの数：4

$$R = \inf_{\lambda_k \notin \sigma_1} |\lambda - \lambda_k| = 0.00104, \quad E_r = \left(\frac{r}{R}\right)^m = 0.79 \times 10^{-6}, \quad C = \frac{E_r^2}{|\lambda_k - \widetilde{\lambda_k}|} = **$$

($|\lambda_k - \widetilde{\lambda_k}| = O(\mathrm{machine}\,\epsilon)$ であるため C は計算できない。)

(i) では $\|\widetilde{w_h}\| \sim E_r$ $(h \geq 5)$ であり、固有値は 14 桁まであっている。

(ii) $n = 25$, $\lambda = 2.0$, $\underline{r = 0.0003}$, $m = 6$, $T_0 = 0.1$

$\|\widetilde{w_2}\| = .355$

$\|\widetilde{w_3}\| = .988$

$\|\widetilde{w_4}\| = .619$

$\|\widetilde{w_5}\| = .306e-03$

$\|\widetilde{w_6}\| = .104e-02$

以下省略.

固有値（ 二分法による）

$\widetilde{\lambda_1} = 2.00005000001658$

$\widetilde{\lambda_2} = 2.00003600031415$

$\widetilde{\lambda_3} = 2.00000000104503$

$\widetilde{\lambda_4} = 1.99995200000477$

一次独立なベクトルの数：4

$$R = \inf_{\lambda_k \notin \sigma_1} |\lambda - \lambda_k| = 0.00104, \quad E_r = \left(\frac{r}{R}\right)^m = 0.58 \times 10^{-3}, \quad C = \frac{E_r^2}{|\lambda_k - \widetilde{\lambda_k}|} = 317$$

(ii) では $\|\widetilde{w_h}\| \sim E_r$ $(h \geq 5)$ で、固有値は 8 桁まであっている。

(iii) $n = 25$, $\lambda = 2.0$, $\underline{r = 0.0005}$, $m = 6$, $T_0 = 0.1$

$\|\widetilde{w_2}\| = .355$

$\|\widetilde{w_3}\| = .988$

$\|\widetilde{w_4}\| = .619$

$\|\widetilde{w_5}\| = .648e-02$

$\|\widetilde{w_6}\| = .219e-01$

以下省略.

固有値（ 二分法による）

$\widetilde{\lambda_1} = 2.00005000759227$

$\widetilde{\lambda_2} = 2.00003614293602$

$\widetilde{\lambda_3} = 2.00000046788874$

$\widetilde{\lambda_4} = 1.99995200212855$

一次独立なベクトルの数：4

$$R = \inf_{\lambda_k \notin \sigma_1} |\lambda - \lambda_k| = 0.00104, \quad E_r = \left(\frac{r}{R}\right)^m = 0.12 \times 10^{-1}, \quad C = \frac{E_r^2}{|\lambda_k - \widetilde{\lambda_k}|} = 326$$

(iii) では $\|\widetilde{w_h}\| \sim E_r$ $(h \geq 5)$ で、固有値は 6 桁まであっている。

E_r^2 と $|\lambda_k - \widetilde{\lambda_k}|$ の比 C は (ii),(iii) でそれぞれ 317, 326 と同じ程度の大きさを示している。ちなみに $r = 0.002, 0.004$ の場合も試してみるとそれぞれ 337, 319 となっている。理論上は $|\lambda_k - \widetilde{\lambda_k}| = O(E_r^2)$ であるからこのことは比例定数が約 300 として定理 1 の主張が数値実験でも正しいことを示している。

(II) σ_1, σ_2 がまとめて得られる例

(I) の (iii) の例で、$T_0 = 0.001$ として計算すると次のような結果になる。これは円 C_1（中心 2.0, 半径 0.0005) の外にある σ_2 に対応する固有ベクトルは十分小さくなっていないが、$\sigma_1 \cup \sigma_2$ 以外の固有ベクトル成分が 10^{-10} 以下になっていて、結果的に $\sigma_1 \cup \sigma_2$ が十分な精度で求まっていることを示すものである。

(i) $n = 25, \quad \lambda = 2.0, \quad \underline{r = 0.0005}, \quad m = 6, \quad \underline{T_0 = 0.001}$

$\|\widetilde{w_2}\| = .355$

$\|\widetilde{w_3}\| = .988$

$\|\widetilde{w_4}\| = .619$

$\|\widetilde{w_5}\| = .648e-02$

$\|\widetilde{w_6}\| = .191e-01$

$\|\widetilde{w_7}\| = .245e-13$

以下省略.

一次独立なベクトルの数：6

固有値（ 二分法による）

$\widetilde{\lambda_1} = 2.00106000000000$

$\widetilde{\lambda_2} = 2.00104120000000$

$\widetilde{\lambda_3} = 2.00005000000000$

$\widetilde{\lambda_4} = 2.00003600000000$

$\widetilde{\lambda_5} = 1.99999999999950$

$\widetilde{\lambda_6} = 1.99995200000000$

$$R = \inf_{\lambda_k \notin \sigma_1 \cup \sigma_2} |\lambda - \lambda_k| = 0.1, \quad E_r = \left(\frac{r}{R}\right)^m = 0.15 \times 10^{-14}$$

$$\left(\frac{0.0005}{0.001}\right)^6 = 0.0156 > 0.001 = T_0$$

この場合の E_r は $\sigma_1 \cup \sigma_2$ 以外の固有ベクトル成分の評価値となっており、$\|\widetilde{w_h}\| \sim E_r$ $(h \geq 7)$ を満たしている。(I) の (iii) の数値からわかるように $\|\widetilde{w_5}\|$, $\|\widetilde{w_6}\|$ は理論的評価値にほぼ等しい 10^{-2} 程度であり、ここで得られたものは T_0 を小さくしてそこまで拾うことで、固有値集団との距離がさらに大きい次の集団との分離がされた結果である。**注4**から考察されるように p としては $\|\widetilde{w_p}\|$ とくらべて $\|\widetilde{w_{p+1}}\|$ が急に小さくなる (i.e. $\dfrac{\|\widetilde{w_p}\|}{\|\widetilde{w_{p+1}}\|} \sim O(10^{-t})$ となる。) ようにとれば、それに応じた精度 $(O(10^{-2t}))$ が得られることになる。

(III) 一定の幅に分布する固有値の計算例

固有値の精度を 14 桁要求するならば $T_0 \sim 10^{-5}$ であればよいことが今までの実験から推定される。これを利用して一定の幅の範囲に分布する固有値（ここでは $\sigma_1 \cup \sigma_2 \cup \sigma_3$) を計算する方法として次の様な実験をした。

3つの円:中心 λ が 2.0, 2.001, 2.1 の円をそれぞれ C_1, C_2, C_3 とし、各円 C_j, $j = 1, 2, 3$ を用いて（他のパラメータは共通な値 $m = 6$, $T_0 = 0.00001$ として）得られるベクトルを $\{v_k^j\}_{k=1}^{p_j}$ とする。$\{v_k^1\} \cup \{v_k^2\} \cup \{v_k^3\}$ の中から一次独立なもの（内積が一定値以下のもの，例えば 10^{-5} 以下のものは直交していると見なして）を選びだし、それを近似固有空間ベクトルとして部分空間法を実行する。ここでは C_1 から 6 個、C_2 から 6 個、C_3 から 3 個の計15個のベクトルが得られ、その中から 9 個が選出された。計算された固有値は 14 桁まであっているものが得られた（数値の表示は省略する)。

(i) $n = 25$, $r = 0.0001$, $m = 6$, $T_0 = 0.00001$

$C_1 : \lambda = 2.0$	$C_2 : \lambda = 2.001$	$C_3 : \lambda = 2.1$
$\|\widetilde{w_2}\| = .357$	$\|\widetilde{w_2}\| = .216$	$\|\widetilde{w_2}\| = .814$
$\|\widetilde{w_3}\| = .992$	$\|\widetilde{w_3}\| = .601e-03$	$\|\widetilde{w_3}\| = .804$
$\|\widetilde{w_4}\| = .636$	$\|\widetilde{w_4}\| = .319e-03$	$\|\widetilde{w_4}\| = .429e-11$
$\|\widetilde{w_5}\| = .481e-04$	$\|\widetilde{w_5}\| = .447e-03$	$\|\widetilde{w_5}\| = .403e-11$
$\|\widetilde{w_6}\| = .138e-03$	$\|\widetilde{w_6}\| = .979e-04$	$\|\widetilde{w_6}\| = .348e-11$
$\|\widetilde{w_7}\| = .162e-11$	$\|\widetilde{w_7}\| = .369e-11$	$\|\widetilde{w_7}\| = .309e-11$
以下省略.	以下省略.	以下省略.

結果として $\frac{\|\widetilde{w_p}\|}{\|\widetilde{w_{p+1}}\|} = O(10^{-8})$ で切っている。IIの結果から推定されるように、$O(10^{-14})$ 以上の精度が得られている。

15個のベクトルから9個選出したとき、残りの6個の各ベクトルについて選出されたベクトルの成分を取り去った残差ベクトルのノルムはいずれも $O(10^{-8})$ であった。

(IV) まとめ

• 行列サイズが25程度の場合の数値実験ではすべて理論通りの結果が得られ、他の固有値から離れた固有値の集合をまとめて計算する方法としての有効性が確かめられた。大行列の場合には初期ベクトルの取り方に工夫を要することが必要かもしれないが、それ以外には特に障害となりそうなことはない。

• 数値計算上のポイントは目的外の固有ベクトル成分が十分小さくなるようなパラメータをとることである。また、精度 $O(10^{-2t})$ を必要とするならば、$\frac{\|\widetilde{w_p}\|}{\|\widetilde{w_{p+1}}\|} = O(10^{-t})$ となる p をとる方法も実際の計算の（精度保証の）目安として使える。

• 実地の計算への適用に際しては、まず固有値の大まかな分布を知ることが必要である。たとえば、後・村田 [1] ではスツルム法で調べている。それから先の彼らの方法は同時逆反復法であるが、その部分を我々の方法と入れ替えれば固有値の密集状況によっては大幅な効率化が期待できる。

参考文献

[1] 後保範，村田健郎，ＣＧ法と同時逆反復法のよる固有値計算，数理研講究録 483 「数値解析アルゴリズムの研究」 40-62 (1983).

[2] Parlett,B.N., The symmetric Eigenvalue Problem, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1980).

[3] Suzuki,T., Inverse iteration method with multiple cyclotomically shifted parameters, (to appear).

[4] Wilkinson,J.L., The algebraic eigenvalue problem, Oxford, London (1965).